

CONTENTS

Igor Pro Getting Started #4	2
合成データの作成	2
Gaussian にカーブフィッティング (1)	4
Gaussian にカーブフィッティング (2)	7
データのソート	9
範囲の一部をフィッティング	11
フィッティング後にフィッティングを外挿する	14
フィッティングを追加する	16

Igor Pro Getting Started #4

合成データの作成

このツアーでは Igor Pro のデータ解析機能について説明します。

分析する何かが必要なので、ランダムな X 値を生成し、数学関数を使った Y 値の合成データを作成して、ソートとカーブフィッティングを行ってみます。

1. メニュー File → New Experiment で、新しい Experiment を作成します。

メニュー Misc → Preferences Off を選択して、プリファレンスがオフになっているようにします。

2. コマンドラインに次を入力して、Enter キーを押します。

```
SetRandomSeed 0.1
```

これは、乱数ジェネレーターを初期化し、このガイドツアーで使うものと同じ結果を返します。

3. 続いて、コマンドラインに次を入力して、Enter キーを押します。

```
Make /N=100 fakeX = enoise(5)+5, fakeY
```

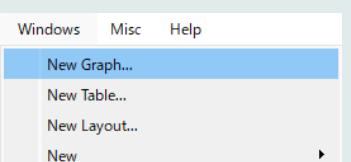
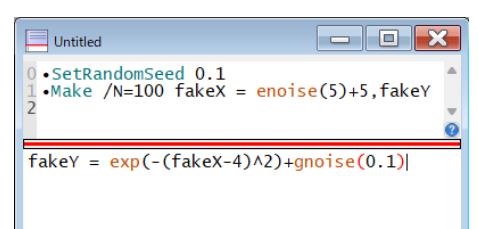
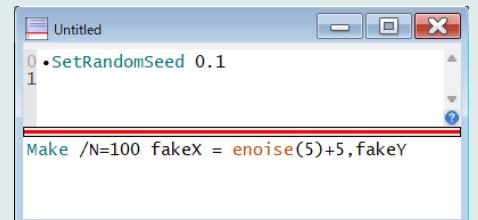
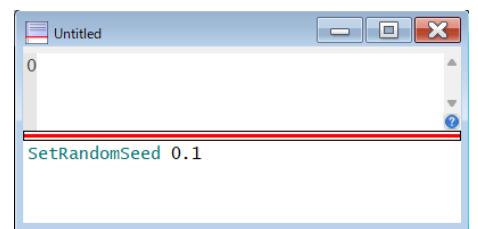
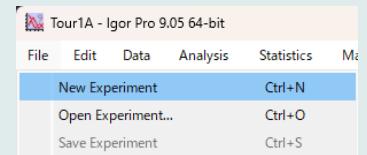
これは、2つの100ポイントの値を持つウェーブを生成し、0~10の範囲で均等に分散したランダムな値で fakeX を埋めます。

4. 同様に、コマンドラインに次を入力して、Enter キーを押します。

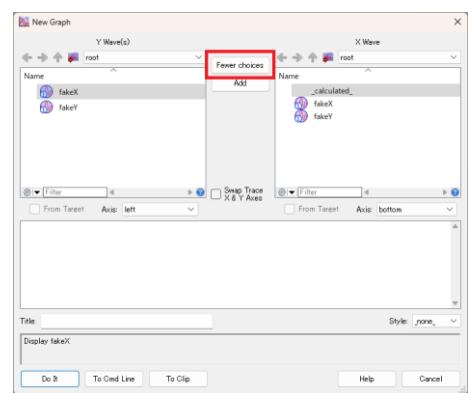
```
fakeY = exp(-(fakeX-4)^2)+gnoise(0.1)
```

これは、4を中心とした Gaussian ピークを生成します。

5. メニュー Windows → New Graph を選択します。



6. 中央上部に Fewer Choices という名前のボタンがある場合は、それをクリックします。

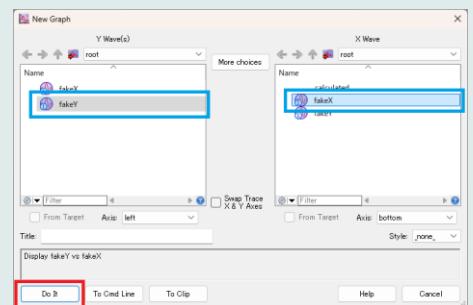


7. Y Wave(s) リストで fakeY 選択してください。

X Wave リストで fakeX を選択してください。

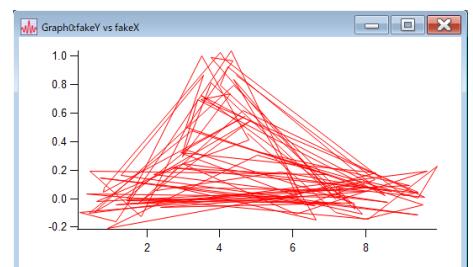
Do It をクリックします。

グラフが線だらけになっているのは、X 値がソートされていないためです。

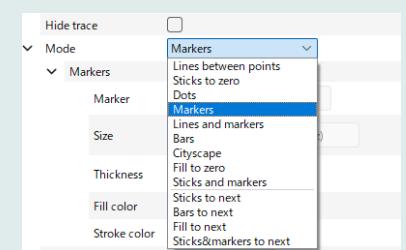


8. 赤いトレースのどこかをダブルクリックしてください。

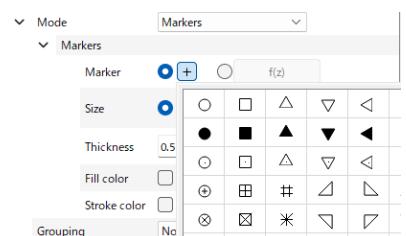
Modify Trace Appearance ダイアログが表示されます。



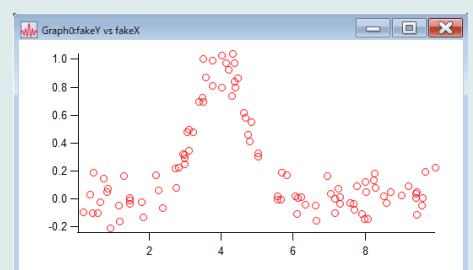
9. Mode ポップアップメニューから Markers を選択してください。



10. Markers ポップアップメニューから「○」を選択してください。



11. Do It をクリックすると、グラフが次のようにになります。



Gaussian にカーブフィッティング (1)

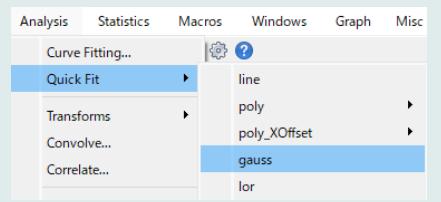
生成した合成データは Gaussian 関数を使って生成しています。

そこで、次のフォームの Gaussian にフィッティングすることで元のパラメーターを抽出してみます。

```
y = y0 + A*exp(-((x-x0)/width)^2)
```

ここで y_0 , A , x_0 , $width$ はフィッティングのパラメーターです。

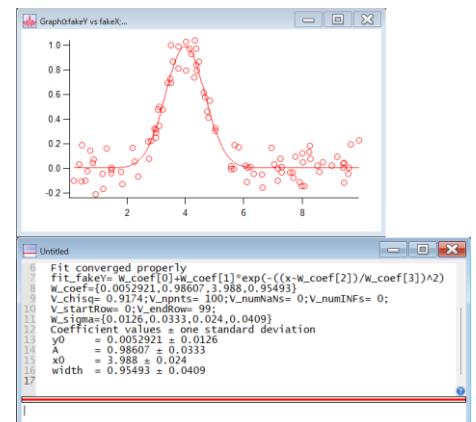
1. メニュー Analysis → Quick Fit → gauss を選択します。



2. Igor は CurveFit コマンドを生成、実行します。

コマンドウィンドウの履歴エリアを少しスクロールすると、それを確認できます。

CurveFit コマンドは、フィッティングを実行し、フィットしたトレースをグラフに追加し、履歴エリアに結果を表示します。



3. 出力された結果の下のほうには、フィッティングパラメーターの値があります。

振幅パラメーター (A) は 1.0 となるべきで、位置パラメーター (x_0) は 4.0 となるべきです。

ここでは、振幅は 0.98607 ± 0.0333 となり、位置は 3.988 ± 0.024 となりました（これは実行ごとに変わります）。

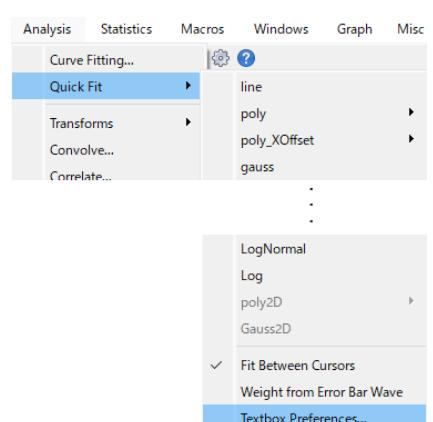
これらの値をグラフに追加してみます。

5. メニュー Analysis → Quick Fit → Textbox Preferences を選択します。

Curve Fit Textbox Preferences ダイアログが表示されます。

ここでグラフにカーブフィッティングの結果を含むテキストボックスを追加できます。

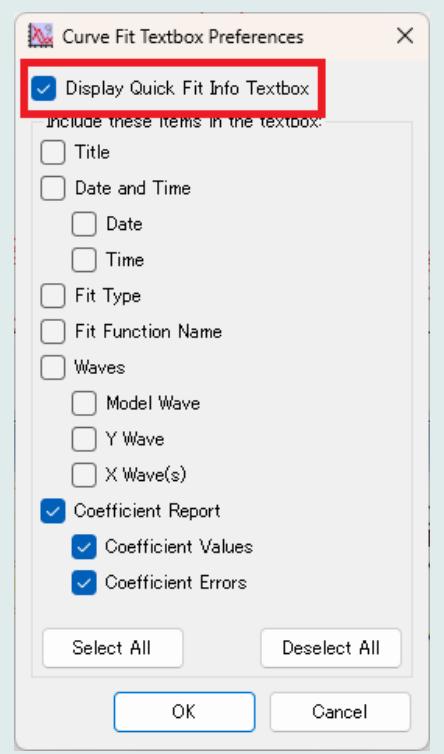
Curve Fit Textbox Preferences ダイアログでは、テキストボックスに含むことができる情報を選択できるチェックボックスがあります。



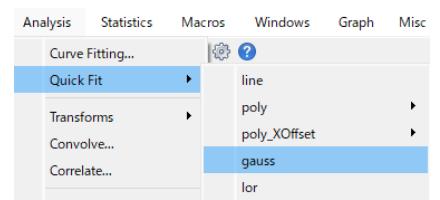
6. Curve Fit Textbox Preferences ダイアログで、Display Curve Fit Info をチェックし、OK をクリックします。

情報テキストボックスが欲しいと指定するものです。

これは今後のクイックフィッティング操作すべてに適用されます。



6. メニュー Analysis → Quick Fit → gauss をもう一度選択します。

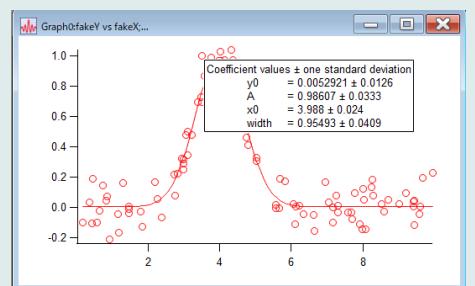


7. グラフにテキストボックスが追加されます。

これは単なるテキストボックスなので、ダブルクリックして編集することができます。

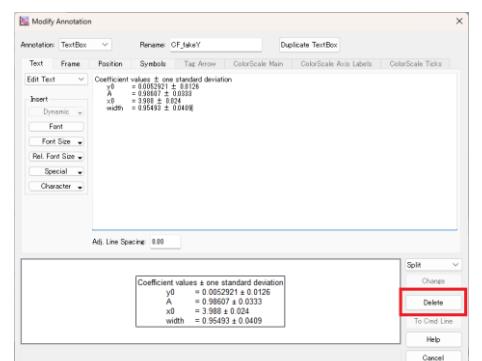
ただし、もう一度フィッティングを行うと、編集が上書きされてしまうため、防止するにはテキストボックスの名前を変えておく必要があります。

テキストボックスは少し大きすぎるので消してみます。



8. テキストボックスをダブルクリックすると、Modify Annotation ダイアログが表示されるので、右下の Delete をクリックします。

次に Quick Fit を行う時には、テキストボックス機能をオフにしない限り、テキストボックスが表示されます。

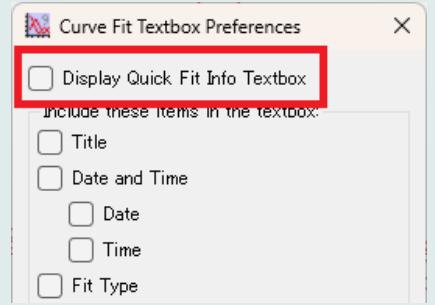


9. メニュー Analysis → Quick Fit → Textbox

Preferences をもう一度選択します。

Curve Fit Textbox Preferences ダイアログで、Display

Curve Fit Info のチェックを外し、OK をクリックします。



10. メニュー Analysis → Quick Fit → gauss をもう一度選

択します。

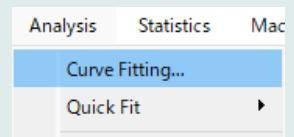
テキストボックスが表示されなくなったことがわかります。

Gaussian にカーブフィッティング (2)

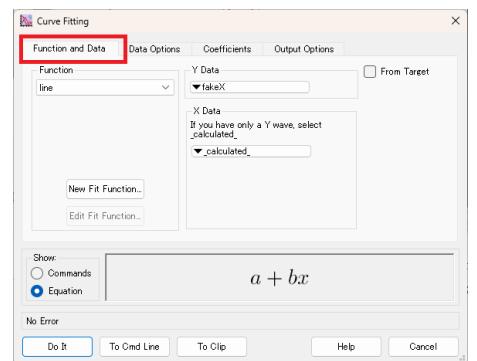
Quick Fit メニューを使うと、ビルトインのフィッティング関数を使って簡単にカーブフィッティングできます。ただ、オプションが限定されているため、より多くのオプションを使うには Curve Fitting ダイアログを使う必要があります。

1. メニュー Analysis → Curve Fitting を選択します。

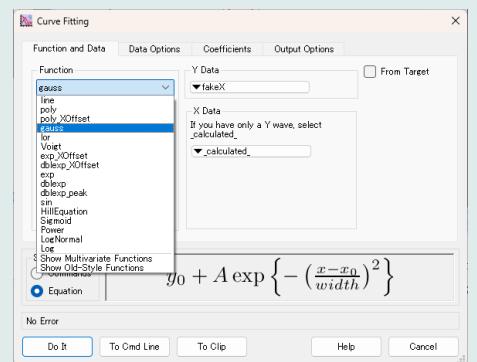
Curve Fitting ダイアログが表示されます。



2. Function and Data タブをクリックします。

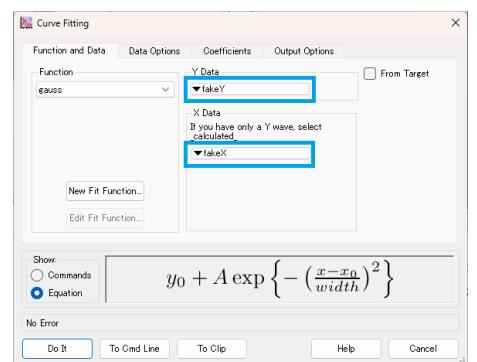


3. Function ポップアップメニューで gauss を選択します。



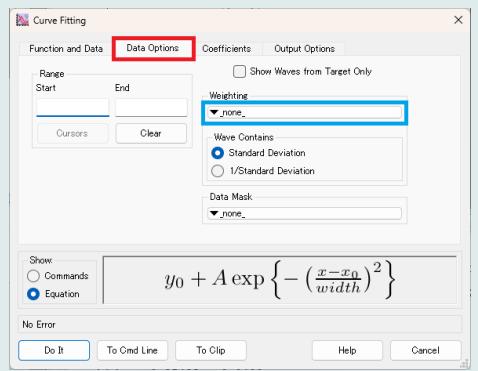
4. Y Data ポップアップメニューで fakeY を選択します。

X Data ポップアップメニューで fakeX を選択します。



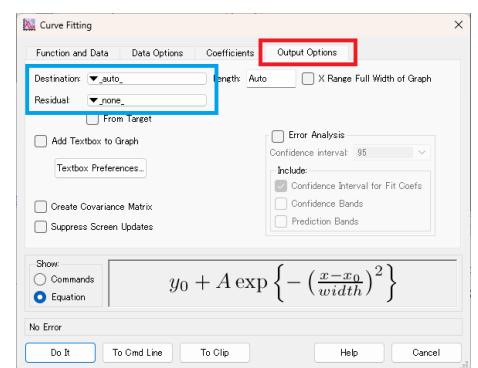
5. Data Options タブをクリックします。

Weighting の Data Mask が `_none_` になっているか確認してください。



6. Output Options タブをクリックします。

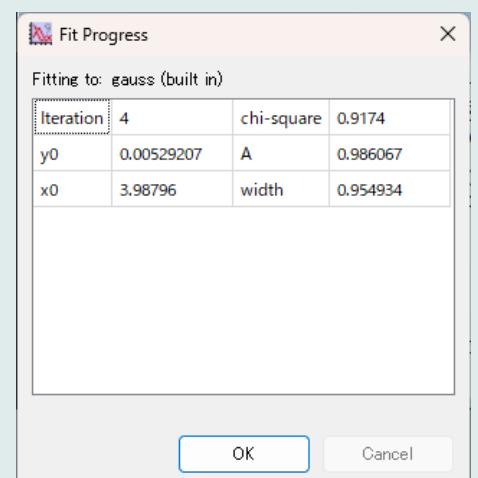
Destination が `_auto_`、Residual が `_none_` になっているか確認してください。



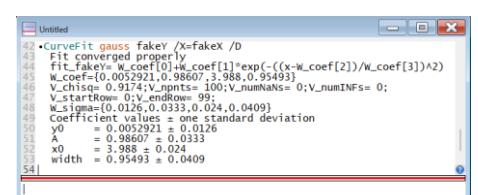
7. Do It をクリックします。

フィッティング処理中、Curve Fit 進捗ウィンドウが表示されます。

フィッティングが完了したら、進捗ウィンドウで OK をクリックします。



8. カーブフィッティングの結果が、これまでのガイドツアーで説明したのと同様に履歴エリアに表示されます。



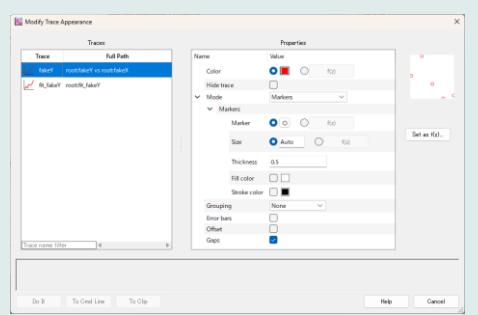
データのソート

ここから、データの一部にカーブフィッティングを行います。
そのために、まず、データを X 値でソートする必要があります。

1. グラフ内のマーカー「○」のどれかをダブルクリックします。

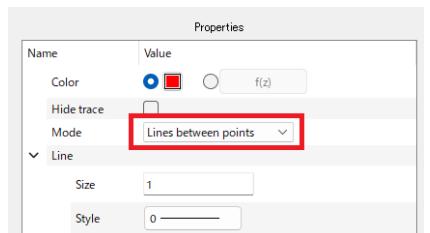
fakeY が選択されている Modify Traces Appearance ダイアログ
が表示されます。

fakeY が選択されていないときは、それをクリックしてください。



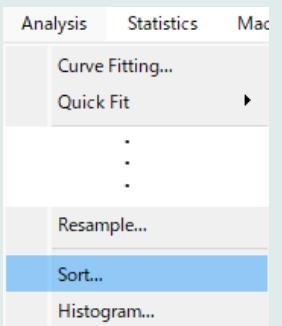
2. Mode ポップアップメニューから、Lines between points を選択し、Do It をクリックします。

fakeY のトレースは、ネズミの巣のような線に戻ります。

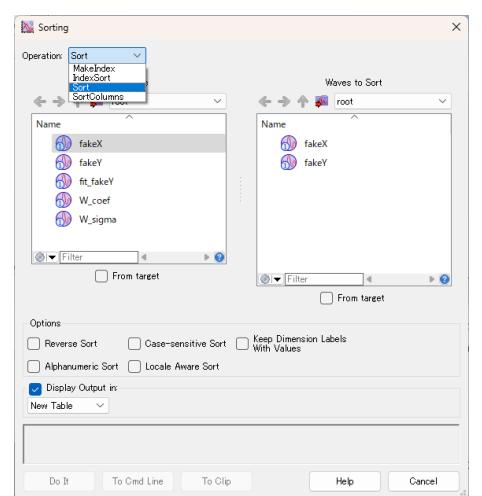


3. メニュー Analysis → Sort を選択します。

Sorting ダイアログが表示されます。

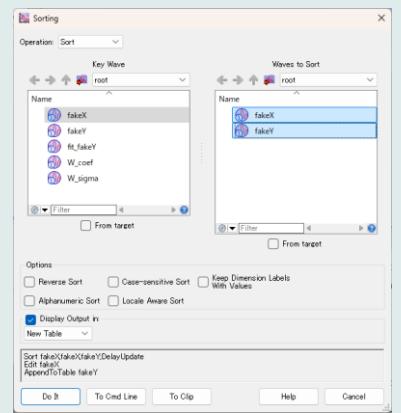


4. Operation ポップアップメニューが Sort になっていなければ Sort を選択します。



5. Key Wave リストから fakeX、Waves to Sort リストから fakeX と fakeY の両方を選択します。

これは、ソートのキーとして fakeX を使い、fakeX と fakeY をソートします。



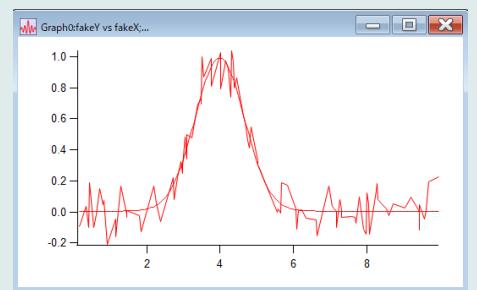
6. ダイアログ下部のチェックボックスのすべてをオフにします。

Display Output in もチェックを外します。

7. Do It をクリックします。

ネズミの巣が解かれます。

ポイント間の線はソートの結果を示すためだけに使っていたため、円のマーカーに戻します。

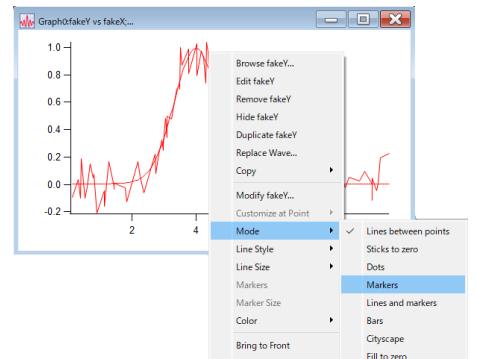


8. fakeY のトレース (ギザギサのほうの線) を、右クリックします。

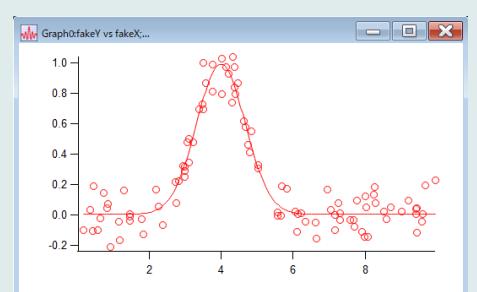
ポップアップメニューが表示されます。

メニューの一番上が 'Browse fakeY' ではない場合は、やり直してください。

ポップアップメニューの Mode サブメニューから Markers を選択します。



9. マーカーが元の「○」になります。



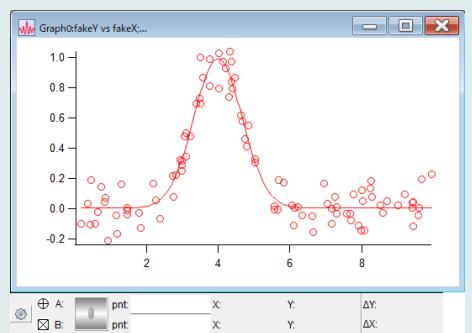
範囲の一部をフィッティング

ここでは、作成したデータを Gaussian でフィッティングしますが、今度はデータのサブセットを使います。その後、最初の範囲外のフィッティングを外挿します。

1. メニュー Graph → Show Info を選択します。

グラフの下にカーソル情報パネルが表示されます。

2つのカーソル、カーソル A とカーソル B がパネルにドッキングされます。

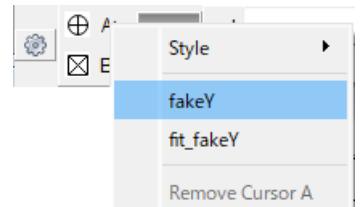


2. カーソル A (丸いほう) を fakeY のトレースに配置します。

カーソルを配置する方法は2つあり、カーソルをドラッグしてトレースに配置する方法、パネルのカーソル名 (A:) を右クリックしてメニューから選ぶ方法があります。

カーソルの配置が完了すると、ドックのカーソル A アイコンが黒くなります。

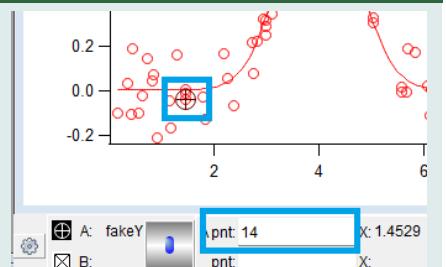
これで、キーボードやスライダーでカーソルを動かすことができるようになります。



3. カーソル A をポイント #14 に移動します。

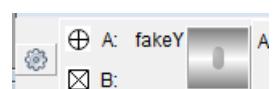
カーソルを点一つずつ動かすにはキーボードの矢印キーを使います。

カーソルのスライダーの少し横をクリックしても移動できます。



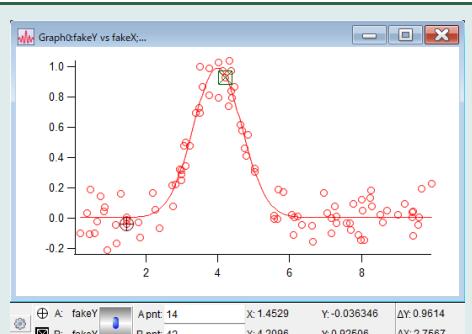
4. カーソル情報パネルでカーソル A をクリックして、選択を解除します。

これでカーソル B を調整するときに、カーソル A に影響することを避けられます。



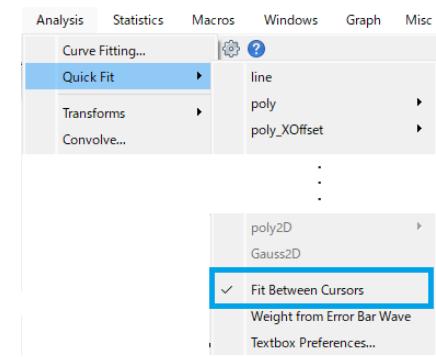
5. カーソル B (四角いほう) を fakeY のトレースに配置し、カーソル B をポイント #42 に移動します。

グラフには2つのカーソルが配置されました。



6. メニュー Analysis → Quick Fit を選択して、Fit Between Cursors にチェックが入っていることを確認してください。

チェックされていない場合は、それをチェックしてください。

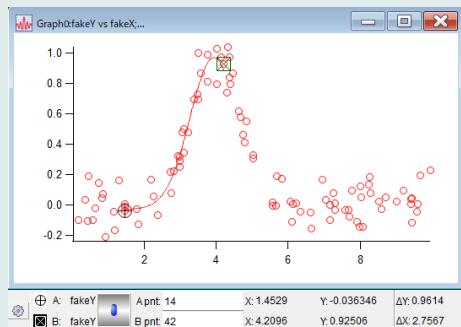


7. メニュー Analysis → Quick Fit → gauss を選択してください。

フィッティングカーブはカーソルで指定した範囲のみ評価されます。

フィッティングしたトレースは X 軸の全範囲にまたがるように表示しつつ、カーソル間のデータのみにフィッティングさせたいです。

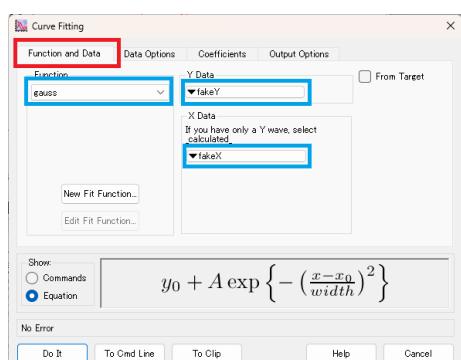
これは Curve Fitting ダイアログでのみ利用可能なオプションの一つです。



8. メニュー Analysis → Curve Fitting を選択して、Function and Data タブをクリックしてください。

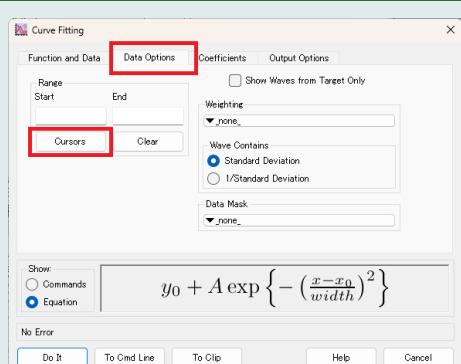
Curve Fitting ダイアログが表示されます。

Function が gauss、Y Data が fakeY、Y Data が fakeX となっていることを確認してください。



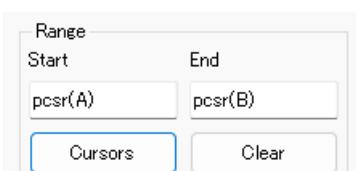
9. Data Options タブをクリックしてください。

Range にある Cursor ボタンをクリックしてください。

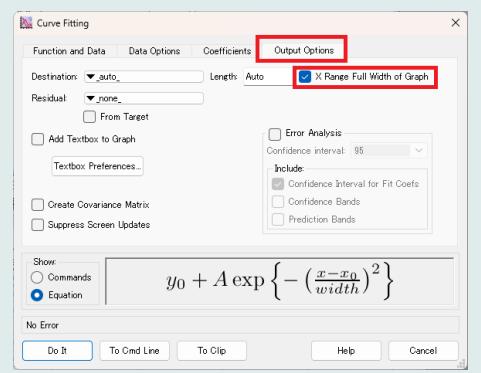


10. テキスト pcstr(A) と pcstr(B) が範囲のボックスに入力されます。

pcstr はカーソル位置にあるウェーブのポイント番号を返す関数です。

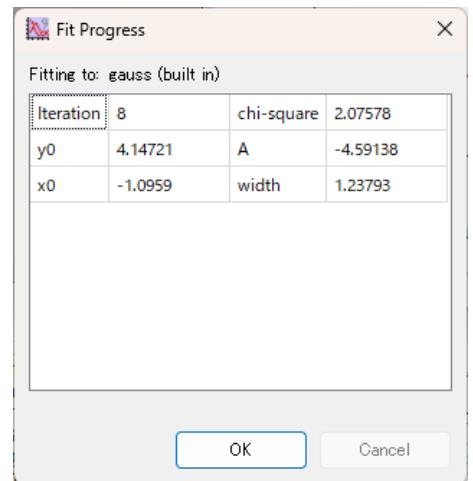


11. Output Options タブを選択し、X Range Full Width of Graph チェックボックスにチェックを入れます。

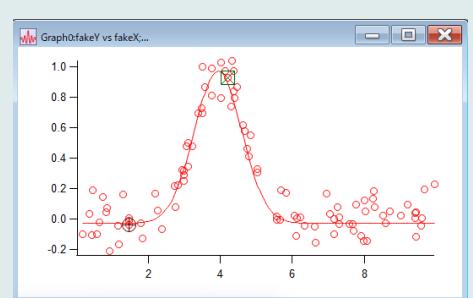


12. Do It をクリックします。

カーブフィッティングが始まり、完了したら OK をクリックします。



13. フィッティングはカーソル間のデータでおこなわれますが、フィッティングのトレースは全体になります。



14. 次のセクションでは短いフィッティングカーブを使うので、メニュー Analysis → Quick Fit → gauss をもう一度選択してください。

フィッティング後にフィッティングを外挿する

Quick Fit メニューを使ったとき、また、Curve Fitting ダイアログの Destination ポップアップメニューで "_auto_" を選択したとき、Igor はフィッティング結果を表示するために fit_fakeY という名前のウェーブを作成しました。

これは、X のスケーリングがフィッティングに使われる X 値の範囲に設定された通常のウェーブです。

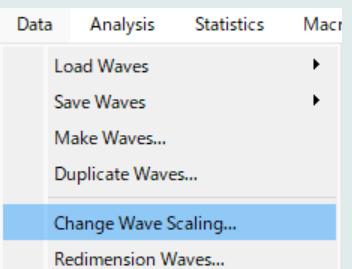
前のセクションでは、カーブフィッティングするときにフィッティングカーブをサブレンジを越えて外挿する方法を説明しました。

ここではウェーブの重要な概念を説明するために、これを手動で行う方法を説明します。

外挿するためには、fit_fakeY の X スケーリングを単純に変更し、次の手順で履歴エリアにある CurveFit コマンドの代入ステートメントを再実行します。

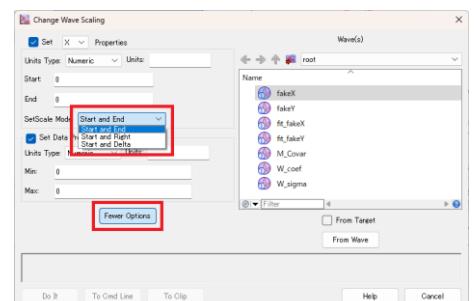
前のセクションの続きから操作します。

1. メニュー Data → Change Wave Scaling を選択します。



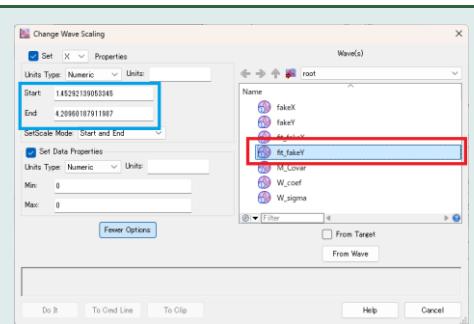
2. More Options ボタンが表示されているときは、それをクリックします。

SetScale ポップアップメニューから Start and End を選択します。

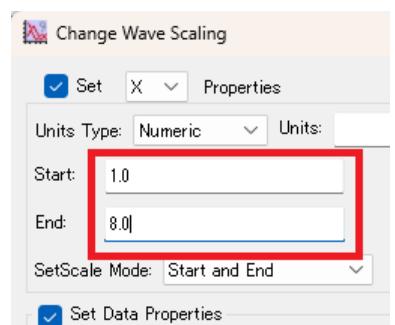


3. リストで fit_fakeY をダブルクリックします。

これは fit_fakeY の X スケーリングの値を読み込みます。
画面では X の始点は約 1.45、X の終点は約 4.20 になっています。

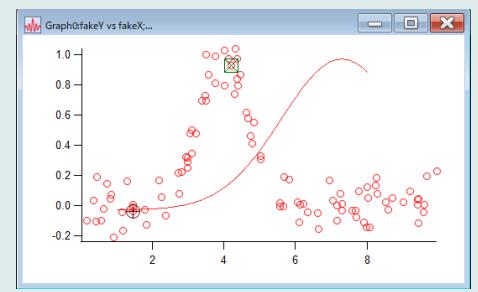


4. Start のボックスに 1.0 を入力し、End のボックスに 8.0 を入力し、Do It をクリックします。



5. `fit_fakeY` のトレースは引き延ばされ、1~8 の範囲で実行されました。

次に、新しい X 値を使った `fit_fakeY` に対する新しい Y 値を計算します。



6. コマンドウィンドウの履歴エリアから、"fit_sakeY="で始まる行を探し、それをクリックします。

行全体が選択されます。

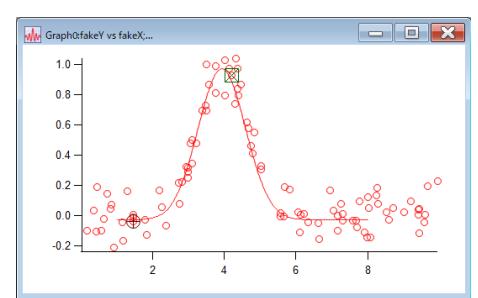
(問題の行は、履歴に出力されたカーブフィッティングレポートの上部にあります。)

```
Untitled
160 fakeY[14,42]
161 fit_fakeY = w_coef[0]+w_coef[1]*exp(-(x-w_coef[2])/w_coef[3])^2
162 w_coef=-0.027401,0.99714,3.9317,0.93613;
163 V_chisq= 0.210307;V_npnts= 29;V_numNans= 0;V_numINFs= 0;
164 V_startRow= 14;V_endRow= 42;
165 w_sigma={0.0406,0.0499,0.0642,0.0942};
166 Coefficient values ± one standard deviation
167 y0 = -0.027401 ± 0.0406
168 A = 0.99714 ± 0.0642
169 x0 = 3.9317 ± 0.0642
170 width = 0.93613 ± 0.0942
171 •SetScale/I x 1.8, , fit_fakeY
172
```

7. Enter キーを押して、履歴エリアからコマンドラインにコピーし、もう一度 Enter キーを押して実行します。

```
Untitled
160 fakeY[14,42]
161 fit_fakeY = w_coef[0]+w_coef[1]*exp(-(x-w_coef[2])/w_coef[3])^2
162 w_coef=-0.027401,0.99714,3.9317,0.93613;
163 V_chisq= 0.210307;V_npnts= 29;V_numNans= 0;V_numINFs= 0;
164 V_startRow= 14;V_endRow= 42;
165 w_sigma={0.0406,0.0499,0.0642,0.0942};
166 Coefficient values ± one standard deviation
167 y0 = -0.027401 ± 0.0406
168 A = 0.99714 ± 0.0642
169 x0 = 3.9317 ± 0.0642
170 width = 0.93613 ± 0.0942
171 •SetScale/I x 1.8, , fit_fakeY
172
```

8. `fit_fakeY` ウエーブが 1~8 の有効なデータを含むようになりました。



フィッティングを追加する

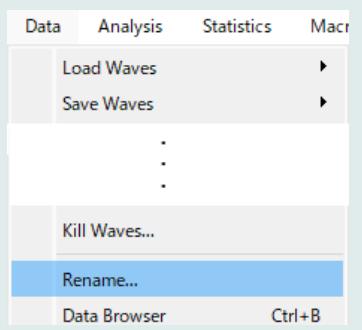
Igor がカーブフィッティングを行うときに自動的に追加されるフィッティングトレースは、Y データの前に "fit_" を追加した名前のウェーブを使います。

同じ Y データにもう一度フィッティングを行うと、そのフィッティングカーブは前のものを上書きします。

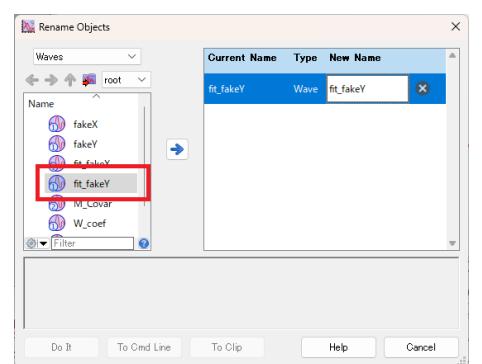
同じデータに対して複数のフィッティングの結果を表示したい場合は、前のフィッティングのウェーブが上書きされないようにする必要があります。

これは、単に名前を変えることで防ぐことが可能です。

1. メニュー Data → Rename を選択します。



2. fit_fakeY という名前のウェーブをダブルクリックして、右のリストに移動します。



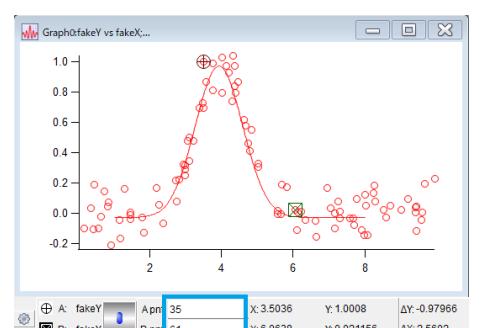
3. New Name のテキストボックスで、"gaussFit_fakeY" と名前を変えます。

Do It をクリックします。



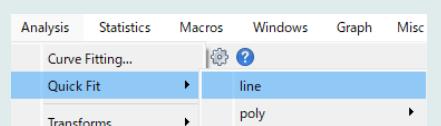
4. A と B のカーソルを、それぞれ 35 と 61 にします。

早い方法は、カーソルのパネルの入力ボックスに 35 と 61 を入力することです。

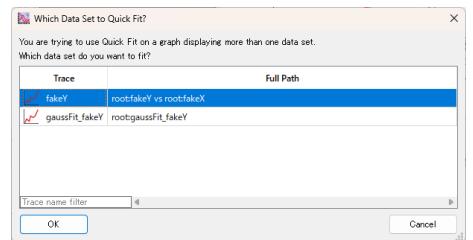


5. メニュー Analysis → Quick Fit → line を選択します。

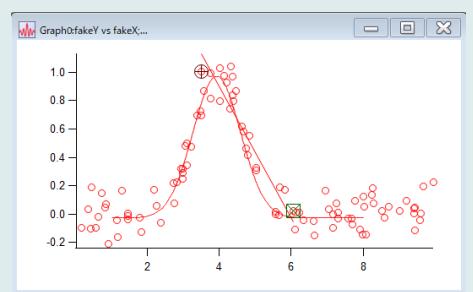
2つのトレースがあり、Quick Fit はどちらをフィッティングするかわからないため、Which Data Set to Quick Fit ダイアログを表示します。



6. リストから fakeY を選択し、OK をクリックします。



7. グラフに直線のフィッティングカーブが追加されました。



8. ガイドツアー 2 はこれで終了です。

必要であれば、Save Experiment As メニューを選択して、Experiment を "Tour2.pxp" として保存します。